

которая является почти самостоятельной единицей кристалла, либо только о «геометрической», структура которой не является определяющей для электронных свойств кристалла.

Список публикаций:

- [1] Dagram T.G., Capaz R.B., Koiler B. // *Phys. Rev.B.* 1997. V. 56. P. 9625.
- [2] Wang L.W., Bellaiche L., Wei S.H., Zunger A. // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. P. 4725.
- [3] Boykin T.B., Klimeck G. // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. P. 115215.
- [4] Boykin T., Kharche N., Klimeck G. // *Phys. Rev.B.* 2007. V. 76.P. 035310.
- [5] Allen P.B., Berlijn T., Casavant D.A., Soler J.M.// *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. P. 085 322.
- [6] Гордиенко А.Б., Кособуцкий А.В. // *ФТТ.* 2016. Т. 58. № 3. С. 451-457.

Структурные и электронные свойства интерфейса графен/силицен

Евсеев Кирилл Васильевич

Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова

Шарин Егор Петрович, д.ф.-м.н.

k.evseev97@gmail.com

В последнее время двумерные материалы вызвали большой интерес благодаря их уникальным свойствам. Недавно была теоретически предсказана и синтезирована экспериментально кремниевая версия графена - силицен. Если графен имеет планарную структуру вследствие полной sp^2 -гибридизации, то силицен является структурой с низким изгибом вследствие частичной sp^2 - sp^3 -гибридизации атомов кремния [1]. Многие уникальные свойства графена также можно наблюдать в силицене, включая его характерное поведение электронов типа Дирака. По сравнению с графеном манипулирование силиценом может быть совместимо с существующей кремниевой промышленностью. Однако у силицена также отсутствует запрещенная зона, которая чрезвычайно важна для электронных устройств [2]. Поэтому поиск действенного способа открыть значительную энергетическую пропасть все еще остается насущной проблемой.

В настоящей работе исследуются структурные и электронные свойства интерфейса графен/силицен. Структура такого интерфейса представляет собой силицен, наложенный на слой графена таким образом, что он составляет сверхрешетку.

Все вычисления проводились с использованием программы Quantum Espresso. В основе лежит метод псевдопотенциала с использованием плоских волн в рамках теории функционала плотности (DFT). Влияние остовных электронов учитывалось путем использования ультрамягких псевдопотенциалов. Использовался нелокальный обменно-корреляционный функционал в параметризации Perdew-Zunger (PZ). Энергия обрезания плоских волн для самосогласованного расчета составляла 60 Ry. Для интегрирования линейной зоны Бриллюэна была использована сетка $5 \times 5 \times 1$ в обратном пространстве.

Таким образом была рассчитана зонная структура суперячеек интерфейса графен/силицен 3×3 , 5×5 и 7×7 . Зонную структуру суперячейки 3×3 с одним допированным атомом азота показан на рисунке снизу (рис.1).

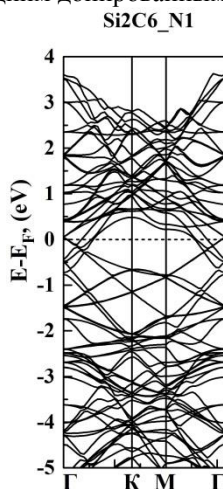


рис.1. Зонная структура суперячейки 3×3 с одним допированным атомом азота.

Список публикаций:

- [1] Patrick B. Benasutti. *Electronic and Structural Properties of Silicene and Graphene Layered Structures* (2012).
- [2] Andres Castellanos-Gomez. *Strain engineering in semiconducting two-dimensional crystals*, *Journal of Physics Condensed Matter* (2015).